

Doktori értekezés tézisei

A $F^- + CH_3I$ S_N2 és proton-transzfer reakciók dinamikájának és mikrohidratációjának elméleti vizsgálata

Olasz Balázs

Témavezető: Dr. Czakó Gábor



Szegedi Tudományegyetem

Természettudományi és Informatikai Kar

Kémiai Intézet

Kémiai Doktori Iskola

Doktori iskola vezetője: Prof. Dr. Tóth Ágota

Elméleti Kémia program

Doktori program vezetője: Prof. Dr. Penke Botond

Szeged, 2019

1. Bevezetés, elméleti háttér

A szerves kémiában kiemelkedő fontossággal bírnak a bimolekuláris nukleofil szubsztitúciós (S_N2) reakciók, melyek esetén egy nukleofil (pozitív töltésű részekhez kötődő) támadó ágens egy szénatomhoz kapcsolódva lecserél egy ahhoz kapcsolódó másik csoportot, amelyet távozó csoportnak nevezünk. Ezek a reakciók sztereospecifikusak, a legtöbb esetben inverzióval játszódnak le, vagyis a termék konfigurációja ellentétes a reaktáns konfigurációjával. A legelőször felfedezett mechanizmus *Paul Walden* nevéhez fűződik, aki 1896-ban fedezte fel azt a reakcióutat, amely során a támadó nukleofil hátulról, vagyis a szénhez kapcsolódó távozó csoporttal ellentétes oldalról közelíti meg a reaktánst és ezután történik meg a reakció, mely során a távozó csoport és a szénatom közötti kötés felhasad és a nukleofil és a szénatom között új kötés alakul ki. Ily módon inverzió játszódik le.

A hagyományos *Walden*-inverziós reakcióút mellett ismertek retenciós reakcióutak is, amelyek közül az előlről támadásos reakcióutat írták le először. 2015-ben Szabó és Czákó a $F^- + CH_3Cl$ reakció esetén felfedeztek egy új retenciós mechanizmust, amely a dupla inverzió nevet kapta. Fontos megjegyezni, hogy a reakció gátmagassága körülbelül 15 kcal/mol-lal az előlről támadásos reakcióút gátja alatt van ezen rendszer esetén, tehát sokkal valószínűbben játszódik le annál, különösen alacsony ütközési energiákon. A dupla inverzió első lépésében a támadó ágens egy protont lehasít a reaktánsból (ezt nevezzük absztrakciónak), majd ez a proton a másik oldalról alakít ki új kötést a maradék két hidrogén átfordulásával szinkronban. Ezzel lejátszódott az első inverzió. A második inverzió egy *Walden*-inverzió amellyel kialakul a végső retenciós termék. Amennyiben a második inverzió nem játszódik le, az eredetihez képest ellentétes konfigurációjú reaktáns keletkezik. Ezt a folyamatot nevezzük indukált inverziónak.

Kémiai reakciók mechanizmusának felderítéséhez alapvető fontosságú a stacionárius pontok, azaz a minimumok és átmeneti állapotok azonosítása, amelyek például az általam vizsgált $F^- + CH_3I$ reakcióra az 1. ábrán láthatóak. A minimumok a reaktánsoknak, termékeknek, vagy a reakció során kialakuló komplexeknek felelnek meg, míg az átmeneti állapotok általában elsőrendű nyeregpontokhoz tartoznak.

A stacionárius pontok felderítése azonban nem elegendő egy reakció vizsgálatához, mivel tudvalévő, hogy egy adott reakció (trajektória) nem feltétlenül (egzaktul soha sem) követi a stacionárius pontok által meghatározott minimum energia útvonalat. Ezért szükséges tehát dinamikai szimulációk elvégzése. Ezek egyik típusa a direkt dinamika szimuláció. Ezekre jellemző a magas gépidő a nagyszámú energiagradiensnek a közvetlenül elektronszerkezet-számító módszerekkel való számítása miatt. Emiatt direkt dinamika szimulációkkal kevés trajektória futtatható, alacsony szintű elektronszerkezet-számító módszerrel számítva a gradienseket.

Ezzel szemben az általam használt módszerrel a reakcióhoz egy analitikus potenciálisenergia-hiperfelületet fejleszték. A felület pontjaihoz tartozó energiákat nagy

pontosságú elektronszerkezet-számító módszerrel számolom és a pontokat az azonos atomok felcserélésére invariáns módon illeszttem. A kapott analitikus felületen kvázi-klasszikus trajektóriákat futtatok, ami azt jelenti, hogy a szimuláció a klasszikus fizika törvényein alapul, ugyanakkor a reaktánsok rezgési energiáját a kvantummechanika törvényei szabják meg. A szimulációhoz szükséges energiagradienseket az analitikus potenciálisenergia-függvény szolgáltatja, emiatt a szimuláció gépideje jelentősen lecsökken a direkt dinamika szimulációk gépidejéhez képest. Ebből pedig az következik, hogy trajektóriák milliói futtathatók az egyes ütközési energiákon, így az eredmények statisztikus bizonytalansága lecsökken és a módszer alkalmas ritka reakcióutak felfedezésére is.

A reakciódinamikai szimulációkhoz tartoznak kezdeti és végső feltételek. A kezdeti feltételek a reaktánsok rezgési energiájának mintavételezése, a reaktánsok relatív helyzetének és relatív sebességének beállítása. A végső feltételek azok, melyek a lefuttatott trajektória-szimulációk eredményeiből nyerhetők. Ide tartoznak a reakcióvalószínűségek és a hatáskeresztmetszetek, illetve a támadási szög, a szórási szög, a relatív translációs energia, a belső energia és a trajektóriahossz eloszlások.

A reakcióvalószínűség definíciója:

$$P(b) = N_{\text{reaktív}}/N_{\text{összes}} , \quad (1)$$

ahol $N_{\text{reaktív}}$ az adott reakciócsatornához tartozó reaktív trajektóriák száma, míg az $N_{\text{összes}}$ az összes trajektóriák száma adott ütközési energián és ütközési paraméter (b) mellett. Az integrális hatáskeresztmetszet a $P(b)$ -nek az ütközési paraméterrel súlyozott és integrált változata:

$$\sigma = \int_0^{b_{\text{max}}} 2\pi b P(b) db . \quad (2)$$

2. Célkitűzés

Doktori munkám elsődleges célja a $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció dinamikájának és mechanizmusainak elméleti vizsgálata volt, különös figyelmet fordítva az új dupla inverziós reakcióút azonosítására és a rezgési gerjesztés hatásának tanulmányozására. Mivel analitikus potenciális energia felület (PES) nem állt rendelkezésre a $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{I}$ rendszerre, célul tűztem ki egy nagypontosságú *ab initio* analitikus PES fejlesztését a $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakcióra, amely az 1. ábrán is feltüntetett stacionárius pontok megkeresésével és magas-szintű *ab initio* leírásával kezdődött. Az analitikus PES hatékony dinamikai szimulációk elvégzését teszi lehetővé és a nagyszámú trajektória alapján terveztem a retenciós reakcióutak megfigyelését.

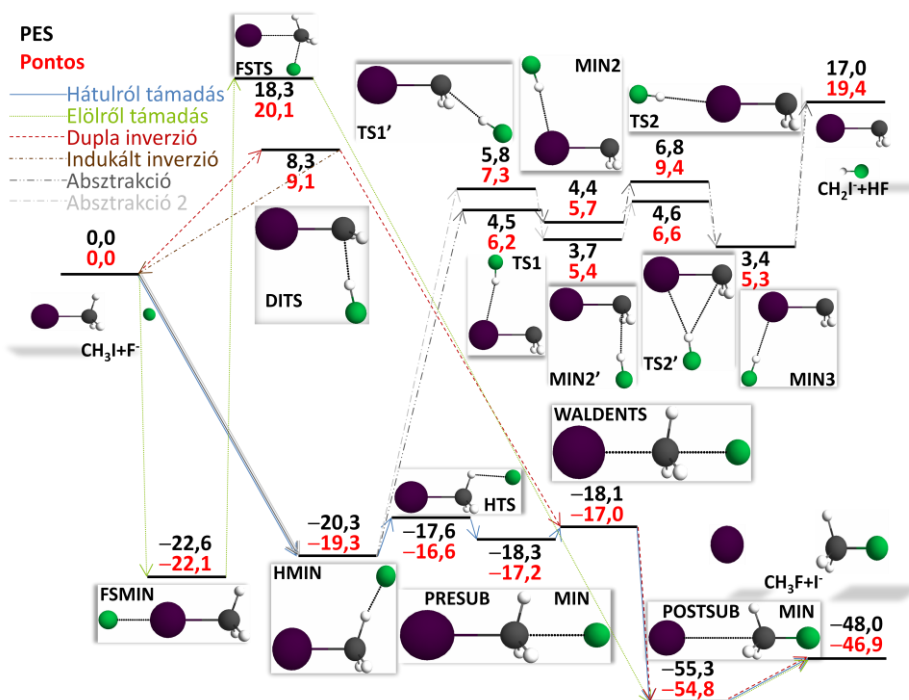
További célom a $\text{F}^- + \text{CH}_3\text{I}$ reakció esetén a metil-jodid reaktáns rezgési gerjesztésének hatását vizsgálni Roland Wester professzor innsbrucki kísérleti csoportjával együttműködésben. A mód-specifikus trajektória-szimulációk elvégzéséhez az előző projekt keretein belül kifejlesztett PES használható fel. A kísérleti csoporttal való együttműködésnek

köszönhetően számításaim eredményeit mérési eredményekkel is összevethetem. Mivel a keresztezett ion-molekula sugár kísérlet csak egy rezgési módus (szimmetrikus CH nyújtás) vizsgálatára és csak két ütközési energiára terjedt ki, egy újabb projekt keretein belül célom volt az összes rezgési módus gerjesztésének hatását tanulmányozni több ütközési energián.

Céljaim között szerepelt az előlről támadásos komplex (lásd FSMIN az 1. ábrán) szerepének vizsgálata a $F^- + CH_3I$ és a $F^- + CH_3Cl$ S_N2 reakciók dinamikája esetén. Ennek a minimumnak a $F^- + CH_3I$ rendszer esetén a jó halogének közötti alacsony elektronegativitása miatt lehet különösen fontos szerepe, ez az oka annak, hogy az 1. ábrán látható mély relatív energiája van ennek a komplexnek. Az ilyen jellegű dinamikai vizsgálat már régóta várat magára, most az általam kifejlesztett $F^- + CH_3I$ PES-nek köszönhetően elvégezhetővé válik a szimuláció.

Tervem volt egy olyan módszer kifejlesztése és implementációja, amely legkisebb négyzetes eltérés alapján trajektória szerkezeteket rendel a stacionárius pontokhoz, amely azért kiemelkedő jelentőségű, mert korábban a stacionárius pontok reakciókban betöltött szerepét általában manuálisan, trajektóriák vizuális megfigyelése alapján vizsgálták.

Végül célul tűztem ki a $F^-(H_2O) + CH_3I$ rendszer stacionárius pontjainak feltérképezését és nagypontosságú *ab initio* jellemzését. Az új stacionárius pontok lehetőséget teremtenek korábban nem ismert reakcióutak javaslatára. Különös figyelmet fordítottam a dupla inverziós mechanizmusok keresésére mikro-hidratált körülmények között, hiszen ebben a reakcióban a víz akár indukálhatja a retenciós metanol képződését.



1. ábra: A $F^- + CH_3I$ reakció energiadiagramja; feltüntetve a különböző reakcióutakat, valamint a potenciálisenergia-felületen számolt (fekete) és a legpontosabb (piros) relatív energiákat (kcal/mol)

3. Módszerek

Geometria-optimalizálásra, frekvencia- és energiaszámolásra a *MOLPRO* programcsomagot használtam. A kvázi-klasszikus dinamika-szimulációk eredményeinek elemzését és a trajektória szerkezetek stacionárius pontokhoz történő asszignálását, saját fejlesztésű, *FORTRAN 90* programnyelven írt kódokkal végeztem. Emellett használtam *shell* és *awk* szkripteket munkám során. A potenciálisenergia-hiperfelület pontjainak illesztéséhez és a kvázi-klasszikus dinamika-szimulációk elvégzéséhez olyan kódokat használtam, amelyek a kutatócsoportunkban rendelkezésre álltak. Trajektóriák vizualizálásához a *MacMolPlt*, míg grafikonok elkészítéséhez az *Origin 6* programot használtam.

A $F^- + CH_3I$ reakcióra kifejlesztett kezdetleges potenciálisenergia-hiperfelület javítása úgy történt, hogy az adott ütközési energián elvileg nem lehetséges trajektóriákból való mintavételezéssel újabb pontokat adtam a felülethez. Ezen trajektóriák azért keletkeztek, mert a potenciálisenergia-függvény bizonyos régiókban nem tartalmazott elegendő pontot, és emiatt túl alacsony energiaértékeket adott ezekre a régiókra. A hiperfelület fejlesztésének végén ellenőriztem azokat a trajektóriákat is, amelyek lehetségesek voltak az adott energián, összehasonlítva a potenciálisenergia-függvény által adott energiákat a *MOLPRO* által a felület pontjaival azonos szinten számolt energiákkal. A felület pontjaihoz tartozó energiákat *CCSD(T)-F12b/aug-cc-pVTZ(-PP)* szinten számítottam felhasználva a *CCSD(T)/aug-cc-pwCVDZ(-PP)* szinten számolt törzselektron korrekciókat. A *CCSD(T)* nagy pontosságú elektronszerkezet-számító módszert jelent, amely figyelembe veszi az elektronok korrelált (összehangolt) mozgását. Az explicit-korrelált *F12* módszerek esetén elektron-elektron távolságokat tartalmazó koordinátarendszert használunk Descartes koordináták helyett. Ezen módszerek esetén kisebb báziskészlettel is jó eredmények érhetők el. A jó atomra a skaláris relativisztikus hatásokat is figyelembe vettem effektív törzspotenciál használatával, amihez a megfelelő pszeudopotenciál (*PP*) bázist használtam.

4. Eredmények

T1. Potenciális-energia hiperfelületet fejlesztettem a $F^- + CH_3I$ reakcióra és a vizsgáltam a $F^- + CH_3I(v=0)$ reakció dinamikáját [1].

A végső felületet 50 496 *ab initio* energiapont illesztésével kaptam. Az alsó energiarégiókban sikerült a kívánt 1 kcal/mol alatti pontosságot elérni a PES illesztés hibájával. Fontos megemlíteni, hogy az alacsony illesztési hiba a kémiailag fontos régiókban szükséges kritériuma a PES-nek, de nem feltétlenül elegendő kritérium a jó potenciálisenergia-felülethez.

A kvázi-klasszikus trajektória-szimulációk eredményei közül a szórási szögeloszlás és a belsőenergia-eloszlás görbék alacsonyabb ütközési energiákon jó egyezést mutattak a

kísérlettel. Meghatároztam még ezen kívül az 1. ábra reakció-energiadiagramját, stacionárius pontok geometriai paramétereit, integrális hatáskeresztmetszeteket, reakcióvalószínűségeket az ütközési paraméter függvényében (opacitás függvények) és a trajektóiahossz-eloszlásokat.

Munkám azt a célját is elérte, miszerint dupla inverziós trajektóriákat találtam erre a rendszerre is (az 1. ábrán látható, hogy ezen rendszer esetén 10-11 kcal/mol-lal van a dupla inverzió gátmagassága az előlről támadásos reakcióút gátja alatt, vagyis alacsonyabb ütközési energiákon ezen rendszer esetén is a dupla inverzió alkotja a retenciós trajektóriák többségét). Trajektóriák vizuális megfigyelésével is alátámasztottam azt a feltevést, hogy valóban dupla inverziós trajektóriákat találtam.

T2. Meghatároztam a $F^- + CH_3I$ reakció rezgési-mód-specifikus dinamikáját [2,3].

Kémiai reakciók esetén a reaktánsoknak adható haladási (transzlációs) energia, rezgési (vibrációs) energia, illetve forgási (rotációs) energia. Különböző reakciókat különböző energiafajtákkal lehet elősegíteni. Atom-kétatomos molekula ütközések esetén közvetlenül alkalmazhatók a *Polanyi-szabályok*, melyek szerint késői-gáttal rendelkező (endoterm) reakciók esetén a rezgési többletenergia segíti a reakciót, míg a korai gát (exoterm reakciók) esetén transzlációs energiával segíthető elő az átalakulás. A *Polanyi-szabályok* összhangban vannak a *Hammond-elvvel*, mely szerint endoterm reakciók átmeneti állapota a termékekhez, míg exoterm reakciók átmeneti állapota a reaktánsokhoz hasonlít jobban szerkezetileg, hiszen ez azt jelenti, hogy az endoterm reakciók átmeneti állapota jelentősen torzult a reaktánsok geometriájához képest.

Többatomos molekuláknak különböző fajta rezgési módusaik vannak. Ez azt jelenti, hogy nem alkalmazhatók ilyen rendszerek reakciói esetén közvetlenül a *Polanyi-szabályok*, hiszen nem mindegy, hogy melyik rezgési módust gerjesztjük egy adott reakció esetén. A $F^- + CH_3I$ reakcióra a CH szimmetrikus nyújtás esetén már sejtették korábban, hogy az a szubsztitúciót nem segíti elő jelentős mértékben, kísérleti eredmény viszont még nem állt rendelkezésre korábban ennek bizonyítására. Roland Wester professzor innsbrucki kísérleti csoportjával együttműködésben végzett kutatómunkánk elméleti és kísérleti úton is alátámasztotta ezt a feltevést, emellett azt is, hogy az absztrakciós (proton transzfer) reakcióút viszont elősegíthető a CH szimmetrikus nyújtás gerjesztésével [2].

A számított integrális hatáskeresztmetszetek az S_N2 reakció esetén csökkenő tendenciát mutatnak az ütközési energia növelésével, amely azzal indokolható, hogy az S_N2 reakciók többsége inverzió, amely gát nélküli és erősen exoterm folyamat a $F^- + CH_3I$ rendszer esetén, így az ütközési energia növelése csak azt eredményezi – különösen magasabb ütközési paraméterek esetén –, hogy a reaktánsok nem kerülnek egymással reaktív orientációba, csupán elhaladnak egymás mellett. Az absztrakciós, indukált inverziós és retenciós folyamatok esetén, amelyek jelentős pozitív gáttal rendelkeznek, az ütközési energia növelése növeli az integrális hatáskeresztmetszetet egy bizonyos ütközési energiáig.

A dupla-inverzió (amely a retenciós trajektóriák többségét alkotja, kivéve a legnagyobb ütközési energiákat) és az indukált inverzió indirekt (viszonylag sok lépésből álló) folyamatok, ezzel szemben az absztrakció általában direkt, gyors folyamat. Az indirekt folyamatoknak nem kedvező a túl magas ütközési energia, mert a rendszerben lévő nagy összenergia jelentősen megnöveli annak az esélyét, hogy a folyamat ne menjen teljesen végig, a rendszer korábban fragmentálódjon, például dupla inverzió vagy indukált inverzió helyett csak absztrakció játszódjon le. Ez az oka annak, hogy e két reakciócsatorna esetén a közepesen nagy ütközési energiák (10–20 kcal/mol) a legkedvezőbbek. Ezzel szemben az absztrakció esetén a legmagasabb ütközési energiák esetén számoltam a legnagyobb integrális hatáskeresztmetszet-értékeket.

A másik, rezgési gerjesztések hatását vizsgáló, tisztán elméleti munkában az összes rezgési módus gerjesztésének hatását több ütközési energián vizsgáltam [3]. A vizsgálat az integrális hatáskeresztmetszet-görbék alapján kimutatta, hogy a C-I nyújtás gerjesztése segíti elő leghatékonyabban az S_N2 inverziót, illetve az is kijelenthető, hogy a CH szimmetrikus nyújtás gerjesztése nemcsak az absztrakciót, hanem a dupla inverziót is hatékonyan segíti. Az utóbbi tény nem meglepő, hiszen a dupla inverziós folyamat is egy proton-absztrakcióval indul.

T3. Feltártuk a $F^- + CH_3I$ rendszer előlről támadásos minimumának szerepét a reakcióban [4].

A bevezetésben említettem, hogy a $F^- + CH_3I$ rendszer esetén kiemelt szerepe van az előlről támadásos komplexnek. A Szabó Istvánnal közös munkánkban először mutattuk ki kvantitatívan, hogy a $F^- + CH_3I$ rendszer esetén lényegesen jellemzőbb a hosszú élettartamú előlről támadásos komplex kialakulása (melyet az 1. ábrán FSMIN-nek neveztem), mint $F^- + CH_3Cl$ rendszer esetén. Emellett a $F^- + CH_3I$ reakcióban jellemző az is, hogy hátulról támadással induló trajektóriából is kialakuljon előlről támadásos komplex.

T4. Kidolgoztam és alkalmaztam egy módszert a trajektória pontjainak stacionárius szerkezetekhez történő asszignálására a $F^- + CH_3I$ reakció esetén [5].

Egy Eckart-transzformáción alapuló módszert implementáltam, amely trajektória geometriákat asszignál stacionárius pontokhoz. Az új módszer és program alkalmazása is kimutatta az előlről támadásos minimum fontos szerepét. Emellett megmutatta, hogy a trajektóriák a legtöbb időt a hidrogénkötéses minimum (HMIN) közelében töltik, ami nem meglepő az 1. ábrán látható alacsony energiája alapján, mint ahogy a posztsubsztitúciós minimum (POSTMIN) kiemelt szerepe is így magyarázható. Ezek az információk leolvashatók azokról az ábrákról, amelyen az egyes stacionárius pontokhoz való asszignáció valószínűségét ábrázoltuk. Fontosak voltak a stacionárius pontok trajektóriapontoktól való eltéréseit ábrázoló diagramok is. Vizsgáltam egy olyan ortogonális trajektória projekciót [4] is, amelyen a fluoridion helyzetét vetítettem a metil-jodid egyik síkjára. Továbbá,

meghatároztam olyan újszerű stacionárius pont átmeneti mátrixokat is, amelyeken a különböző stacionárius pontokhoz asszignált trajektóriapontok közötti átmenetek valószínűségeit ábrázoltam. Végül vizsgáltam az asszignált stacionárius szerkezetek időfüggését néhány reprezentatív trajektória esetén.

T5. Minden korábbinál részletesebben és pontosabban feltérképeztem a $F^-(H_2O) + CH_3I$ rendszer stacionárius pontjait és javaslatot tettem egy új víz-indukált dupla inverziós reakcióút létezésére [6].

A $F^-(H_2O) + CH_3I$ rendszerrel kapcsolatos munkám során 29 stacionárius pontot és az ezekből összeállított reakció-energiadiagramokat határoztam meg és diszkutáltam. A stacionárius pontokat korábbi cikkek, saját kémiai intuíció és minimum-energiaút számolások alapján találtam. Öt különböző reakcióutat javasoltam, melyek közül három a vízmentes rendszer Walden-inverziós, dupla inverziós és előlről támadásos mechanizmusának mikrohidratált verziója. Két reakcióút esetén a víz, illetve a hidroxidion a reaktáns. Az egyik esetben először hidroxidion képződik a fluoridion és a víz reakciójából, és az így keletkezett hidroxidion invertálja a metil-jodidot. A másik a víz-indukált dupla inverziós útvonal, amely azzal kezdődik, hogy a fluoridion lehasít egy protont, majd ezután a vízmolekula a lehasított protonnal ellentétes oldalra donál egy protont, így megvalósul az első inverzió. Végül a keletkezett OH^- ionnal lejátszódik egy *Walden*-inverzió, és két inverzióval retenciós metanol képződik.

5. Közlemények és konferencia részvételek

5.1. A disszertáció alapjául szolgáló közlemények

1. High-level *ab initio* potential energy surface and dynamics of the $F^- + CH_3I$ S_N2 and proton-transfer reaction
B. Olasz, I. Szabó, G. Czakó
Chem. Sci., 2017, 8, 3164-3170
IF₂₀₁₇: 9,063
Független hivatkozások száma: 8
2. Stretching vibration is a spectator in nucleophilic substitution
M. Stei, E. Carrascosa, A. Dörfler, J. Meyer, B. Olasz, G. Czakó, A. Li, H. Guo, R. Wester
Sci. Adv., 2018, 4, eaas9544
IF₂₀₁₇: 11,511
Független hivatkozások száma: 3
3. Mode-specific quasiclassical dynamics of the $F^- + CH_3I$ S_N2 and proton-transfer reactions
B. Olasz, G. Czakó
J. Phys. Chem. A, 2018, 122, 8143-8151
IF₂₀₁₇: 2,836
Független hivatkozások száma: 0
4. Deciphering front-side complex formation in S_N2 reactions via dynamics mapping
I. Szabó, B. Olasz, G. Czakó
J. Phys. Chem. Lett., 2017, 8, 2917-2923
IF₂₀₁₇: 8,709
Független hivatkozások száma: 10
5. Uncovering the role of the stationary points in the dynamics of the $F^- + CH_3I$ reaction
B. Olasz, G. Czakó
Phys. Chem. Chem. Phys., 2019, 21, 1578-1586
IF₂₀₁₇: 3,906
Független hivatkozások száma: 0
6. High-level-optimized stationary points for the $F^-(H_2O) + CH_3I$ system: Proposing a new water-induced double-inversion pathway
B. Olasz, G. Czakó
J. Phys. Chem. A, 2019, 123, 454-462
IF₂₀₁₇: 2,836
Független hivatkozások száma: 1

5.2. A disszertációhoz kapcsolódó, fel nem használt közlemények

1. Effects of the level of electronic structure theory on the dynamics of the $F^- + CH_3I$ reaction
T. Győri, B. Olasz, G. Paragi, G. Czakó
J. Phys. Chem. A, 2018, 122, 3353-3364
IF₂₀₁₇: 2,836
Független hivatkozások száma: 3

5.3. A disszertáció témájához nem kapcsolódó közlemények, szabadalom

1. Synthesis, characterization, and electrocatalytic properties of a custom-designed conjugated polymer with pyridine side chain
D. Hursán, G. London, B. Olasz, C. Janáky
Electrochim. Acta, 2016, 217, 92-99
IF₂₀₁₆: 4,798
Független hivatkozások száma: 2
2. Continuous-flow solid-phase peptide synthesis: A revolutionary reduction of the amino acid excess
I. M. Mándity, B. Olasz, S. B. Ötvös, F. Fülöp
ChemSusChem, 2014, 7, 3172-3176
IF₂₀₁₄: 7,657
Független hivatkozások száma: 18
3. Continuous-flow solid-phase peptide synthesis: A revolutionary reduction of the amino acid excess
I. M. Mándity, B. Olasz, S. B. Ötvös, F. Fülöp
J. Pept. Sci., 2014, 20, S57-S57
IF₂₀₁₄: 1,546
Független hivatkozások száma: 0
4. Continuous flow peptide synthesis
F. Fülöp, I. Mándity, B. Olasz
Lajstromszám: WO2015128687 A1
Közzététel éve: 2015
Nemzetközi szabadalom

5.4. Konferencia részvételek

1. Nagy hatékonyságú peptidszintézis
Olasz Balázs
XXXII. Országos Tudományos Diákköri Konferencia, OTDK
Budapest, 2015. (szóbeli előadás)
2. $F^- + CH_3I$ reakció dinamikájának és mikroszolvatációjának elméleti vizsgálata
Olasz Balázs
XLI. Kémiai előadói napok, KEN
Szeged, 2018. (szóbeli előadás)
3. $F^- + CH_3I$ reakció dinamikájának és mikroszolvatációjának elméleti vizsgálata
Olasz Balázs, Czakó Gábor
MTA Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottság Ülése
Veszprém, 2018. (szóbeli előadás)

Referált közlemények folyóiratban

Disszertációhoz kapcsolódó: 7

Összes: 10

Összesített impakt faktor

Disszertációhoz kapcsolódó: 41,697

Összes: 55,698

Összes független hivatkozás

Disszertációhoz kapcsolódó: 25

Összes: 45